Die Monte-Carlo-Methode

Michelle Zeuner

14. Juni 2011

1 Motivation

Die Monte-Carlo-Methode ist ein stochastisches Verfahren, das mittels vielen künstlichen, zufälligen Stichproben u.a. schwere oder analytisch nicht lösbare Probleme numerisch zu lösen versucht. Da mit einer höheren Stichprobenanzahl die Genauigkeit steigt, kann auf das Gesetz der großen Zahlen zurückgegriffen werden.

Anwendungsbereiche:

- Alternative statt mathematische, analytische Berechnungen
- Komplexe Prozessdarstellungen
- Verteilungseigenschaften von Zufallsvariablen (unbekannter Verteilungstyp)

2 Pi

Die Kreiszahl π (Pi) stellt sowohl das Verhältnis zwischen Umfang und Durchmesser, als auch die Kreisfläche bei einem Radius der Größe 1 dar. π ist sowohl eine irrationale, als auch transzendente Zahl. Da sie analytisch nicht exakt berechnet werden kann, bietet sich die Monte-Carlo-Methode hervorragend für eine möglichst genaue π-Bestimmung an.

Dazu wird der Einheitskreis genutzt, dessen Mitte sich im Nullpunkt befindet. Es werden n zufällige Punkte in den Intervallen $x = [-1\,|1]$ und $y = [-1\,|1]$ generiert, wovon sich k Punkte zufällig im Kreis befinden. Wurde ein Punkt in den Kreis generiert, so gilt $x^2 + y^2 \leq 1$, andernfalls befindet sich der Kreis außerhalb.

$$\tfrac{\pi}{4} \approx \tfrac{k}{n} \qquad \Rightarrow \qquad \pi \approx \tfrac{4k}{n} = X$$

Chernoff-Ungleichung für geschätztes π (= X) mittels MC-Methode (für $\varepsilon < 1$):

$$Pr(|X - \pi| \geq \varepsilon\pi) \leq 2e^{\frac{-n\pi e^2}{12}}$$

Die Exaktheit der Approximation kann mit ausreichend vielen Zufallspunkten erreicht werden. Auf Grund der Irrationalität kann π nie zu 100% ermittelt werden.

(ε, δ)-Definition:
Randomisierte Algorithmen haben eine (ε, δ)-Approximation für einen Sollwert V und den vom Algorithmus gelieferten Wert X. Es gelten: $\varepsilon, \delta > 0$ und $\lim_{x \to c} f(x) = L$.

Für alle x gilt: Wenn $0 < |x - c| < \delta$, dann sei $|f(x) - L| < \epsilon$.

$$Pr(|X - V| \leq \varepsilon V) \geq 1 - \delta$$

Solange $\varepsilon < 1$ und die Anzahl der Duchläufe groß genug gewählt wird, so dass $2e^{\frac{-n\pi e^2}{12}} \leq \delta$ erfüllt wird, existiert für die π-Schätzung eine (ε, δ)-Approximation. Um dies zu ermöglichen, sollten $n \geq \frac{12 \ln \frac{2}{\delta}}{\pi \varepsilon^2}$ Zufallspunkte generiert werden.

3 DNF-Zählproblem (#DNF)

#DNF befindet sich in der Komplexitätsklasse #P. Probleme aus #P handeln von Zählproblemen, deren Entscheidungsprobleme in NP liegen. Daher sind Probleme aus #P mindestens so schwer wie Probleme aus NP. Das entsprechende Entscheidungsproblem zu #DNF ist das SAT-Problem (DNF-Terme können immer in KNF-Terme umgewandelt werden).

Algorithmus #DNF I:
Input: DNF-Formel F mit n Variablen
Output: Y = c(F)-Approximation

1. $X = 0$
2. Für $k = 1$ bis m:
   a) Generiere eine randomisierte Belegung (gleichverteilt aus allen 2^n möglichen Belegungen, zu $\frac{c(F)}{2^n}$ erfüllend).
   b) Falls die Belegung erfüllt: $X = X + 1$
3. Return $Y = (\frac{X}{m} * 2^n)$

Problem: Algorithmus ist nicht unbedingt polynomiell in der Problemgröße ($= 2^n$).

Ziel ist nun die Erstellung eines FPRAS für #DNF.

Ein **FPRAS** (fully polynomial randomized approximatoin scheme) ist ein randomisierter Algorithmus für ein Problem mit dem Input x, $\epsilon > 0$ und $0 < \delta < 1$. Der Algorithmus gibt zu V(x) (= Output) eine (ε, δ)-Approximation in polynomieller Zeit in $\frac{1}{\epsilon}$, $ln\frac{1}{\delta}$ und der Eingabegröße von x an.

Je Klausel C_i gilt: |erfüllende Belegungen für C_i| $= 2^{n-|Variablen \in C_i|}$.

Hierbei definieren wir SC_i als die Menge aller gültigen Belegungen für C_i.

$$\text{U} = \text{alle } SC_i,\ |\text{U}| = \sum_{i=1}^{t} |SC_i|$$

Gesucht: c(F) = $|\bigcup_{i=1}^{t} SC_i|$ (Anzahl gültige Belegungen)

Es wird eine Submenge S aus U definiert, die bei gleichen Belegungen diejenige aus dem SC_i mit dem geringsten Index nimmt.

Algorithmus #DNF II:
Input: DNF-Formel F mit n Variablen
Output: Y = c(F)-Approximation

1. $X = 0$
2. Für $k = 1$ bis m:
   a) Mit Wahrscheinlichkeit $\frac{|SC_i|}{|U|}$ wähle a $\in SC_i$.
   b) Falls a in keinem SC_j, $j < i$: $X = X + 1$
3. Return $Y = (\frac{X}{m} * |U|)$

Es handelt sich beim #DNF II um einen FPRAS, wenn $m = \left\lceil (\frac{3t}{\epsilon^2}) * \ln(\frac{2}{\delta}) \right\rceil$.

$$\frac{X}{m}\text{: } (\varepsilon,\ \delta)\text{-Approximation} = \frac{c(F)}{|U|}$$
$$Y\text{: } (\varepsilon,\ \delta)\text{-Approximation} = c(F)$$

4 Approximatives Sampeln zu approximatives Zählen

Anhand der bisherigen Ergebnisse kann festgestellt werden, dass eine Verbindung zwischen dem Sampeln in einem geeignetem Raum und dem Zählen von bestimmten Elementen in dem Raum besteht. Falls uniformes Samplen einer Lösung zu einem kombinatorischen Problem möglich ist, kann ein randomisierter Algorithmus erstellt werden, der die Anzahl der Lösungen approximativ Zählen kann.

Definition
Sei w die randomisierte Ausgabe von einem Sampling Algorithmus zu einem abgeschlossenen Sample Raum Ω. Der Sampling Algorithmus generiert ein ϵ-uniformes Sample aus Ω, wenn $|\Pr(w \in S) - \frac{|S|}{|\Omega|}| \leq \epsilon$.

Ein Sampling Algorithmus ist ein **FPAUS** (fully polynomial almost uniform sampler) für ein gegebenes Problem, wenn die Bedingungen der Definition erfüllt sind und die Laufzeit polynomiell in $\ln \frac{1}{\epsilon}$ und der Eingabegröße ist.

5 Markov-Kette Monte-Carlo-Methode (MCMC-Methode)

Die MCMC-Methode ist ein Vorgehen, um das Sampeln zu einer gewünschten Wahrscheinlichkeitsverteilung zu ermöglichen. Dabei stellt die Zustandsmenge der Markov-Kette den Sample Raum dar und die stationäre Verteilung die erwartete Sampling Verteilung. Hierbei ist das Ziel das Finden von effizienten Markov-Ketten.

Bei der einfachsten stationären Verteilung handelt es sich um die Gleichverteilung über einen Zustandsraum Ω. Um die gewünschte stationäre Verteilung zu erlangen, muss die Markov-Kette irreduzibel sein. D.h. dass man, bei gegebenen n, in n Schritten von jedem Zustand zu jeden anderen gelangen kann.

Zu einem abgeschlossenen Zustandsraum Ω und einer Nachbarschaftsstruktur $\{N(X)|x \in \Omega\}$, sei $N = max_{x\in\Omega}|N(x)|$. M sei eine Zahl, so dass $M \geq N$.

Wahrscheinlichkeiten für $P_{x,y}$: $0 \quad (\text{wenn } x \neq y \text{ und } y \notin N(x))$

$\frac{1}{M} \quad (\text{wenn } x \neq y \text{ und } y \in N(x))$

$1 - \frac{|N(x)|}{M} \quad (\text{wenn } x = y)$

Wenn die Markov-Kette irreduzibel und aperiodisch ist, handelt es sich bei der stationären Verteilung um eine Gleichverteilung.

Metropolis-Algorithmus
Der Metropolis-Algorithmus ermöglicht die Konstruktion einer zeitreversiblen Markov-Kette mit einer gewünschten Wahrscheinlichkeitsverteilung, die nicht zwangsweise die Gleichverteilung sein muss.

Zu einem abgeschlossenen Zustandsraum Ω und einer Nachbarschaftsstruktur $\{N(X)|x \in \Omega\}$, sei $N = max_{x\in\Omega}|N(x)|$. M sei eine Zahl, so dass $M \geq N$. Für alle $x \in \Omega$ gilt: Sei $\pi_x > 0$ die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilung in Zustand x als stationäre Verteilung.

Wahrscheinlichkeiten für $P_{x,y}$: $0 \quad (\text{wenn } x \neq y \text{ und } y \notin N(x))$

$\frac{1}{M}\min(1, \frac{\pi_y}{\pi_x}) \quad (\text{wenn } x \neq y \text{ und } y \in N(x))$

$1 - \sum_{y\neq x} P_{y,x} \quad (\text{wenn } x = y)$

Wenn die Markov-Kette irreduzibel und aperiodisch ist, ist die stationäre Verteilung durch die Wahrscheinlichkeiten in π_x gegeben.

6 Quelle

Michael Mitzenmacher, Eli Upfal: *Probability and computing: randomized algorithms and probabilistic analysis* (Cambridge University Press, 2005)